場の理論における断熱定理と非平衡熱力学(基研短期研究会「進化の力学への場の理論的アプローチ」報告,研究会報告)

福田, 礼次郎

1974)

20. H. Haken, *Synagetics-An Introduction* (Springer-Verlag, Berlin 1978).
21. H. Hasegawa, *Thermodynamics and Transient Dynamics of Simple Optical Systems with Instability* Springer Series in Solid-state Sciences **18** (Springer Verlag 1980); H. Hasegawa, M. Mizuno and M. Mabuchi, Prog. Theor. Phys. **67** (1982) 98.
22. N. Hashitsume, Prog. Theor. Phys. **8** (1952) 461.
23. H. Hasegawa, Prog. Theor. Phys. **56** (1976) 44.
24. H. Hasegawa, Prog. Theor. Phys. **57** (1977) 1523; H. Hasegawa, M. Mabuchi and S. Sawada, Proc. 4th Rochester Conf. on Coherence and Quantum Optics, Rochester (1977) Plenum (1978) 667.
25. E. Nelson, *Dynamical theories of brownian motion* (Princeton University Press 1967).
26. K. Yasue, J. Funct. Anal. **41** (1981) 327.
27. H. Hasegawa, Phys. Rev. D **33** (1986) 2508.
28. Qian, Minping, *The Entropy Production and Reversibility of Markov Processes* preprint for Intern. Conf. Probability Theory 1985 Nagoya.
29. T. Nakagomi and H. Hasegawa, unpublished.
30. R. Kubo and N. Hashitsume, *Statistical Physics*, (Springer 1985).

後　記

1. Onsager-Machlup理論に現れる二種の散逸関数$\Phi(J)$と$\Psi(X)$とはLegendre変換によって変数Jから変数Xに移れることが散逸極小原理とエントロピー極小原理との間の関係を与える。これを非線形の場合に拡張しようという一柳氏の提案は中野藤生氏のアイディアである(私信および中野氏のプレプリント)。しかし筆者の理解する限り，それは確率過程の理論から導かれるものではないようである。

2. この報告を書いたのち，他のもう一つの研究会「カオスとその周辺」が催された。散逸系のカオスにおいては'strange attractor'の測度に対する変分原理が確立していて，最近の高橋陽一郎氏の研究によれば，それは熱平衡状態に関するGibbsの変分原理と同様な形式で書かれる。しかし，散逸系カオスのstrange attractorが非平衡系の基本的定常状態であるということから，むしろそれはOnsagerの散逸極小原理に対応するものではないかと思われる。今後の解明が期待される問題点の一つであろう。

場の理論における断熱定理と非平衡熱力学

慶大・理工　　福　田　礼次郎

熱的にisolateされたマクロな系のHamiltonianを

$$H(\alpha_i(t)) \qquad i=1,2,\cdots N$$

に取る。ここで$\alpha_i(t)$は時間に依存する外部パラメーターで例えば系の体積Vや磁場Hなどを表わすものとする。α_iを無限にゆっくり変化させたときの内部エネルギーの変化は，$\dot{\alpha}_i \equiv \frac{d}{dt}\alpha_i$として，

$$dE = -pdv + \cdots \equiv \sum_{i=1}^{N} X_i(t)\,d\alpha_i(t) = \sum_{i=1}^{N} X_i\,\dot{\alpha}_i\,dt \tag{1}$$

と与えられX_iは時刻tでの平衡分布による期待値である。式(1)は断熱変化の際の公式で，α_iがゆっくり変化しない場合の最初の補正を考えると，熱力学の第2法則を用いて

$$dE = \sum_i X_i(t)\,d\alpha_i(t) + \sum_{i,j} Y_{ij}(t)\,\dot{\alpha}_i(t)\,\dot{\alpha}_j(t) \tag{2}$$

の様になるはずでありY_{ij}のsymmetric partは正定値行列である。

ここでは，式(2)の展開をミクロなHamiltonianから導くのを目的とする。方法はKuboのlinear response の時のものと全く同じで外場$\alpha_i(t)$のべきで展開する代りに時間微分・（ドット）の数で展開する。つまり仮定と方法を列挙すると，

(i) シュレーディンガー表示のHamiltonian $H(\alpha_i(t))$を

$$H(\alpha_i(t)) = H(\alpha_i(-\infty)) + \Delta H(\alpha_i(t))$$

の様に分解し，パラメーターの原点を$\alpha_i(-\infty)=0$になるように取る。さらに$\Delta H(\alpha_i(-\infty))=0$である。

(ii) 密度行列の運動方程式

$$\dot{\rho}(t) = i\,[\rho(t),\,H(\alpha_i(t))]$$

を積分する。その際$\rho(-\infty)$は平衡分布にとる。特にmicrocanonical分布にとると計算しやすい。

(iii) $\alpha_n(t)$をTaylor展開して，・の数でまとめる。そしてlowestの項に対して断熱定理を用いる。

結果は

(i) 式(2)の展開は正しい。例えば$\ddot{\alpha}$に比例する項は出ない。

(ii) X_i，Y_{ij}は確かに時刻tでの平衡分布による期待値となっておりY_{ij}のexactな表式はY_{ij}の対称部分は正定値であることを示している。

(iii) ・のHigher termsに対する公式も機械的に求まる。それらの符号については何もいえない。

議論は“相互作用表示”で行う。Hamiltonian $H(\alpha_i(t))$を

$$H(\alpha_i(t)) = H_0 + \Delta H(t),$$

ただし$H_0 = H(\alpha_i(-\infty))$，$\Delta H(t) = \Delta H(\alpha_i(t))$，のように書き$H_0$をbaseに$\Delta H(t)$を相互作用と見なす。$t=0$ですべての表示が一致しているとすれば，シュレーディンガー表示，相互作用表示（I

と書く），Heisenberg表示（Hと書く）の関係は任意のオペレーターA（t）に対して次のようになる。

$$A^I(t)=\exp\left(\frac{i}{\hbar}H_0 t\right)A(t)\exp\left(-\frac{i}{\hbar}H_0 t\right)$$
$$=U(t,0)A^H(t)U^\dagger(t,0).$$

ただし

$$U(t',t)\equiv T\exp - i\int_t^{t'}\Delta H^I(t'',\alpha(t''))\,dt''$$

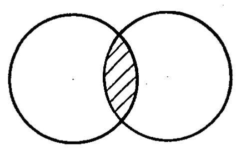
を用いた。密度行列に対しては

$$\rho^I(t)=U(t,0)\rho^H U^\dagger(t,0)$$
$$=U(t,t')\rho^I(t')U(t',t)$$

が成り立つ。よって任意の時刻tでの期待値に対する公式は

$$\langle A(t)\rangle_t = \mathrm{Tr}\,\rho^H A^H(t)=\mathrm{Tr}\,\rho^I(0)A^H(t)$$
$$=\mathrm{Tr}\,U(0,-\infty)\rho^I(-\infty)U(-\infty,0)U(0,t)A^I(t)U(t,0)$$
$$=\mathrm{Tr}\,\rho^I(-\infty)U(-\infty,t)A^I(t)U(t,-\infty).$$

もし$\Delta H^I(t)=\sum\alpha_i(t)O_i^I(t)$なら$\alpha_i$の一次近似でlinear responseの公式となる。以下のadiabatic展開とlinear responseの適用可能範囲の関係は下図のようである。



α_iが小さくてかつ時間変化もゆっくりしている時は両者の公式は一致する。
まずA（t）としてtotal Hamiltonianを取る；

$$\langle H(t)\rangle_t=\mathrm{Tr}\,\rho^I(-\infty)U^\dagger(t)H^I(t)U(t)$$

ただし$U(t)\equiv U(t,-\infty)$。次の様な公式が$U^\dagger(t)H^I(t)U(t)$に対して導ける。（証略）

$$U^\dagger(t)H^I(t)U(t)=H_0+U^\dagger(t)L(t) \tag{3}$$

$$U^\dagger(t)L(t)\equiv U^\dagger(t)\sum_i\int_{-\infty}^{\infty}dt'\,\dot{\alpha}_i(t')\frac{\partial}{\partial\alpha_i(t')}U(t).$$

これはGellman-Lowの公式の一般化である。一般化力を

$$X_i^I(t')=\left(\frac{\partial\Delta H(\alpha(t'))}{\partial\alpha_i(t')}\right)_I$$

で導入すると

$$U^{\dagger}(t)L(t)=\sum_i\int_{-\infty}^{t}dt'\,U^{\dagger}(t')X_i^{I}(t')U(t')\dot{\alpha}_i(t') \tag{4}$$

と書け，これは力（ユニタリー変換を受けているが）と変位の積の $t=-\infty$ から t までの和となっていて外力のなした全仕事の形となっている。これらを用いて，さらに $\rho^{I}(-\infty)=\delta(H_0-E_0)$ と仮定すると

$$\begin{aligned}\langle H(t)\rangle_t&=\mathrm{Tr}\,\delta(H_0-E_0)U^{\dagger}(t)H^{I}(t)U(t)/\mathrm{Tr}\,\delta(H_0-E_0)\\&=E_0+\mathrm{Tr}\,\delta(H_0-E_0)U^{\dagger}(t)L(t)/\mathrm{Tr}\,\delta(H_0-E_0)\end{aligned}$$

と書ける。さて式(3)において $U(t')$ をくわしく書くと

$$U(t')=\mathrm{T}\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{t'}dt''\,\Delta H^{I}(t'',\alpha(t''))\right)$$

であるが，ここで $\Delta H^{I}(t'',\alpha(t''))$ のdynamicalな t'' dependenceとkinematicalな $\alpha(t'')$ を通しての t'' dependenceを分離する。つまり次のようにadiabatic展開を定義する。

$$\alpha_i(t'')=\alpha_i(t')+(t''-t')\dot{\alpha}_i(t')+\cdots\cdots$$

$$\Delta H^{I}(t'',\alpha(t''))=\Delta H^{I}(t'',\alpha(t'))+\sum_i(t''-t')\frac{\partial\Delta H^{I}(t'',\alpha(t'))}{\partial\alpha_i(t')}\dot{\alpha}_i(t')+\cdots$$

さらに

$$U_0(t',t)\equiv\mathrm{T}\exp-\frac{i}{\hbar}\int_{t}^{t'}dt''\,\Delta H^{I}(t'',\alpha(t')),$$

$$U_0(t')\equiv U_0(t',-\infty)$$

を導入すると，次の表式を得る。

$$U^{\dagger}(t)L(t)=\int_{-\infty}^{t}dt'\,U_0^{\dagger}(t')W(t')U_0(t')$$

$$\begin{aligned}W(t')=&\sum_i\hat{X}_i(t',t')\dot{\alpha}_i(t')\\&+\frac{i}{\hbar}\sum_{ij}\int_{-\infty}^{t'}dt''(t''-t')[\hat{X}_i(t'',t'),\hat{X}_j(t'',t')]\dot{\alpha}_i(t')\dot{\alpha}_j(t')\\&+O(\dot{\alpha})^3,\ O(\dot{\alpha}\ddot{\alpha}).\end{aligned}$$

ここで

$$\hat{X}_i(t'',t')\equiv U_0^{\dagger}(t'',t')\frac{\partial\Delta H^{I}(t'',\alpha(t'))}{\partial\alpha_i(t')}U_0(t'',t')$$

であって $-\infty<t''<t'$ の間は $\alpha_i(t')$ にfixされたパラメーターで時間発展する表示をとっていることを表わしている。これはadiabatic展開にとって自然な表示である。さて $\Delta\mathcal{E}(t)\equiv\langle H(t)\rangle_t-E_0$ は

$$\varDelta\mathcal{E}(t)=\mathrm{Tr}\,\delta(H_0-E_0)\int_{-\infty}^{t}U^{\dagger}(t')W(t')U(t')\,dt'/\mathrm{Tr}\,\delta(H_0-E_0)$$

$$=\mathrm{Tr}\int_{-\infty}^{t}dt'\,\delta(U_0(t')H_0U_0^{\dagger}(t')-E_0)W(t')/\mathrm{Tr}\,\delta(U_0(t')H_0U(t')-E_0)$$

となる。ここで

$$U_0(t')=T\exp-\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{t'}dt''\varDelta H^{I}(t'',\ \alpha(t'))$$

$$=\mathrm{ad\text{-}lim}\,T\exp-\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{t'}dt''\varDelta H^{I}(t'',\ \alpha(t''))$$

$$=\mathrm{ad\text{-}lim}\,U(t')$$

であることに注意する。ただし ad-lim とは $\alpha(t')$ をfixして $-\infty<t''<t'$ の間では $\dot{\alpha}_i(t'')\to 0$ とするlimitである。よって式(3)を用いると

$$\delta(U_0(t')H_0U_0^{\dagger}(t')-E_0)=\mathrm{ad\text{-}lim}\,\delta(H^{I}(t')-L(t')U^{\dagger}(t')-E_0)$$

ここで詳しい断熱定理の結果によると（証略），これは

$$\delta(H^{I}(t')-\varDelta E(E_0,\ t')-E_0)$$

と書ける。$\varDelta E(E_0,\ t')$ は $t=-\infty$ で E_0 であった固有状態が $t=t'$ でやはり固有状態にシフトするがエネルギーが $\varDelta E(E_0,\ t')$ だけずれるがその大きさを表わしている。それは E_0 の関数である。$E(t)=E_0+\varDelta E(E_0,\ t')$ とおくと，t' での平衡分布 $\delta(H^{I}(t')-E(t'))$ を得る。これで準備を完了して $\varDelta\mathcal{E}(t)$ に対する我々の公式を得る。

$$\varDelta\mathcal{E}(t)=\sum_{i}\int_{-\infty}^{t}dt'\,X_i(t')\,\dot{\alpha}_i(t')$$

$$=\sum_{ij}\int_{-\infty}^{t}dt'\,Y_{ij}(t')\,\dot{\alpha}_i(t')\,\dot{\alpha}_j(t')+O(\dot{\alpha})^3,\quad O(\dot{\alpha}\ddot{\alpha})$$

$$X_i(t')=\langle\hat{X}_i(t',\ t')\rangle_{eq.t'}$$

$$=\left\langle\frac{\partial\varDelta H^{I}(t',\ \alpha(t'))}{\partial\alpha_i(t')}\right\rangle_{eq.t'},$$

$$Y_{ij}(t')=i\int_{-\infty}^{\infty}dt''(t''-t')\,G_{ij}^{r}(t''-t',\ \alpha(t'))$$

$$G_{ij}^{r}(t''-t',\ \alpha(t'))\equiv\frac{1}{\hbar}\theta(t'-t'')\langle[\hat{X}_i(t'',\ t'),\ \hat{X}_j(t',\ t')]\rangle_{eq.t'}$$

$$\equiv\theta(t'-t'')\,\chi''_{ij}(t''-t',\ \alpha(t'))$$

ここで $\langle\cdots\rangle_{eq.t'}$ とは $\delta(H^{I}(t')-E(t'))$ による平均を意味する。この結果前述の(i)，(ii)，(iii)を明らかにすることができる。その為には $\chi''_{ij}(t''-t',\ \alpha(t'))$ の t'' によるフーリエ変換 $\chi''_{ij}(\omega)$ に対してよく知られた

$$d\chi''^{S}_{ij}(\omega)/d\omega\,|_{\omega=0}\geq 0$$

が成立することに注意すれば充分である。ここで添字Sは対称部分を意味する。エントロピーの増加分も

$$\exp S(t')=\mathrm{Tr}\,\delta(H^{I}(t')-E(t'))$$

としてエントロピーを定義すれば

$$\Delta S=S(t')-S(-\infty)=\Delta\mathcal{E}(t')_{n.a.}/T(t')_{ad.}\geq 0$$

と求まる。ここで$\Delta\mathcal{E}(t')_{n.a.}$は$\Delta\mathcal{E}(t')$のnon-adiabaticな部分，$T(t')_{ad}$は分布$\delta(H^{I}(t')-E(t'))$に対応する温度であって，$\delta$-関数をパラメーター表示したときのパラメーターの停留点で求まる。

エネルギー以外のoperator X_nについても

$$\langle X_n(t)\rangle_t=\mathrm{Tr}\,\rho^{I}(-\infty)U^{\dagger}(t)X_n(t)U(t)$$

$$=X_n(t)+\sum_{n,m}Y_{mn}(t)\dot{\alpha}_m(t)+\cdots$$

となり$\langle X_n(t)\rangle_t\equiv\varphi_n(t)$とおいてこの式を$\alpha$について解けばGinzburg-LandauのExactな公式を得る；

$$\sum_m D_{n,m}(\varphi(t))\dot{\varphi}_m(t)+\frac{\partial F(\varphi(t))}{\partial\varphi_m(t)}+\alpha_n(t)=0$$

$$D_{n,m}(\varphi(t))\equiv\sum_{m',n'}F_{nn'}Y_{m'n'}F_{m'm}$$

$$F_{nn'}\equiv\partial^2F(\varphi)/\partial\varphi_n\partial\varphi_m$$

ここで$F(\varphi)$は平衡系でのFree energyで$F_{n,m}$が正定値ゆえD_{nm}も正定値である。

その他保存則のある時等いろいろな応用ができるが紙面の関係で割愛させて頂く。

詳しくは"Non-Equilibrium Thermodynamics and Its Corrections to Thermal Equilibrium" R. Fukuda (Keio University preprint)をご参照下さい。

協力現象の統計力学的理論
— コヒーレント異常法とその応用 —

東大・理　　鈴 木 増 雄

§1. はじめに

自然現象は，多かれ少なかれ互に相互作用をしている多体系の協力現象である。それを一般的に扱う方法が存在するだろうか。もっとも簡単でよく用いられる方法は，平均場近似である。しかし，臨界視